Kapitel 4: NumPy-Grundlagen

McKinney, W. (2017). *Python for Data Analysis: Data Wrangling with Pandas, NumPy, and IPython.* 2. Auflage. Sebastopol, CA [u. a.]: O'Reilly.

Überarbeitet durch armin.baenziger@zhaw.ch. Letzte Anpassung: 13.01.2020

- NumPy, kurz für Numerical Python, ist ein zentrales Packet für numerische Berechnungen in Python.
- In diesem Kapitel werden Arrays und das Konzept der "Vektorisierung" eingeführt.
- Da Pandas auf NumPy aufbaut, sind Grundlagenkenntnisse in NumPy hilfreich.

```
In [1]: %autosave 0

Autosave disabled
```

NumPys Ndarray: Ein mehrdimensionales Array-Objekt

Zuerst laden wir die NumPy-Bibliothek mit der üblichen Abkürzung np:

```
In [2]: import numpy as np
```

- Eine wichtige Datenstruktur in NumPy ist der N-dimensionale Array, oder ndarray, welcher ein schneller, flexibler Container für grosse Datensets in Python ist.
- Es folgt ein Beispiel von einem Ndarray:

arr1 ist zweidimensional. In der Datenanalyse sind ein- und zweidimensionale Arrays üblich.

```
In [4]: arr1.ndim # Dimension des Array
Out[4]: 2
In [5]: arr1.shape # arr1 hat zwei Zeilen und drei Spalten
Out[5]: (2, 3)
```

- Mit Arrays können mathematische Operationen auf ganze Datenblöcke angewendet werden.
- Die Syntax ist dabei ähnlich wie bei den entsprechenden Operationen zwischen Skalaren.
- · Beispiel:

Ein ndarray ist ein multidimensionaler Container für homogene Daten (Daten vom gleichen Typ).

```
In [8]: arr1.dtype # Datentyp im Array
Out[8]: dtype('int32')
```

Ndarrays erstellen

Listen können mit der Funktion array einfach in Arrays umgewandelt werden.

```
In [9]: | liste1 = [6, 7.5, 8, 0, 1]
        arr1 = np.array(liste1)
        arr1
Out[9]: array([6., 7.5, 8., 0., 1.])
In [10]: arr1.ndim # eindimensionaler Array (Vektor)
Out[10]: 1
In [11]: liste2 = [[1, 2, 3, 4], [5, 6, 7, 8], [9, 10, 11, 12]]
        arr2 = np.array(liste2)
        arr2
[ 9, 10, 11, 12]])
In [12]: arr2.ndim # Zweidimensionaler Array (Matrix)
Out[12]: 2
In [13]: | arr2.shape
                    # Atribut shape: Der Array hat 3 Zeilen und 4 Spalten.
Out[13]: (3, 4)
```

Mit der Methode reshape kann ein Array in eine neue Form gebracht werden.

Spezielle Arrays erstellen:

Die np-Funktion arrange entspricht der range -Funktion in Core-Python.

```
In [15]: np.arange(10)
Out[15]: array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])
```

Arrays mit lauter Nullen erstellen:

Arrays mit lauter Einsen erstellen:

Anlegung eines Arrays ohne speziellen Inhalt (Container für später hinzuzufügenden Inhalt):

Kontrollfragen:

```
In [22]: # Gegeben:
    array1 = np.array([3, 4, 1, 0, 2, 2])
    array1

Out[22]: array([3, 4, 1, 0, 2, 2])

In [23]: # Frage 1: Was ist der Output?
    array1.ndim
Out[23]: 1
```

Mehr zur Arithmetik mit NumPy-Arrays

- Arrays sind wichtig, weil man mit ihnen viele Batch-Operationen ohne for -Loops umsetzen kann. Man spricht von *Vektorisierung (vectorization)*.
- Arithmetische Operationen zwischen Arrays mit gleichen Dimensionen (bzw. Shape ist identisch) führen dazu, dass die Operationen **elementweise** durchgeführt werden.

```
In [26]: # Gegeben:
         arr1 = np.array([[1, 2, 3], [4, 5, 6]])
         arr1
Out[26]: array([[1, 2, 3],
                [4, 5, 6]])
In [27]: # Gegeben:
         arr2 = np.array([[0, 2, 1], [1, 0, 3]])
         arr2
Out[27]: array([[0, 2, 1],
                [1, 0, 3]])
In [28]: arr1 + arr2 # elementweise Addition
Out[28]: array([[1, 4, 4],
               [5, 5, 9]])
In [29]: arr1 ** arr2 # elementweise Potenz
Out[29]: array([[ 1,
                      4, 3],
                       1, 216]], dtype=int32)
                [ 4,
```

Operationen mit einem Skalar ("einzelner Wert") führen dazu, dass der Skalar auf jedes Element des Arrays übertragen wird. Man spricht von "Broadcasting".

Elementweise Multiplikation:

Hinweis für diejenigen, die sich mit linearer Algebra auskennen: Die eigentliche Matrixmultiplikation wird mit np.dot() oder @ umgesetzt.

Kontrollfragen:

```
In [33]: # Gegeben:
         arr1
Out[33]: array([[1, 2, 3],
                [4, 5, 6]])
In [34]: # Gegeben:
        arr2
Out[34]: array([[0, 2, 1],
                [1, 0, 3]])
In [35]: # Frage 1: Was ist der Output?
         arr1.shape
Out[35]: (2, 3)
In [36]: # Frage 2: Was ist der Output?
         arr1 - 3
Out[36]: array([[-2, -1, 0],
               [ 1, 2, 3]])
In [37]: # Frage 3: Was ist der Output?
         arr2 * 3
Out[37]: array([[0, 6, 3],
               [3, 0, 9]])
In [38]: # Frage 4: Was ist der Output?
         arr1 - arr2
Out[38]: array([[1, 0, 2],
                [3, 5, 3]])
```

Grundlegende Indexierung und Slicing

Zur Erinnerung: Python beginnt die Indexierung mit 0 (1. Wert in der Sequenz).

```
In [39]: arr = np.arange(10, 20)
arr
Out[39]: array([10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19])
In [40]: arr[5] # Indexierung wie gewohnt
Out[40]: 15
In [41]: arr[-1] # Letzter Wert der Sequenz
Out[41]: 19
```

```
In [42]: arr[:3] # Slicing wie gewohnt
Out[42]: array([10, 11, 12])
In [43]: arr[5:8]
Out[43]: array([15, 16, 17])
In [44]: arr[5:8] = 0
arr
Out[44]: array([10, 11, 12, 13, 14, 0, 0, 0, 18, 19])
```

Ein wichtiger Unterschied zwischen (built-in) Python-Listen und NumPy-Arrays liegt darin, dass Array-Sclices **Views** (und keine Kopie) auf den Original-Array darstellen.

```
In [45]: arr_slice = arr[5:8]
arr_slice
Out[45]: array([0, 0, 0])
In [46]: arr_slice[1] = 999
arr  # Auch das Original wurde verändert!
Out[46]: array([ 10, 11, 12, 13, 14, 0, 999, 0, 18, 19])
```

Will man explizit eine Kopie (und keinen View), muss man die copy -Methode verwenden.

Indexierung und Slicing bei Arrays mit höheren Dimensionen

Zwei Dimensionen

Bei zweidimensionalen Arrays (Matrizen) gilt der Merksatz: Zeilen zuerst, Spalten später

```
In [53]: arr2d[2,:]
                        # Alternative zu arr2d[2]
Out[53]: array([6, 7, 8])
In [54]: arr2d[:,1] # 2. Spalte auswählen
Out[54]: array([1, 4, 7])
In [55]: arr2d[:2, 1:] # Die ersten zwei Zeilen und ab zweiter Spalte
Out[55]: array([[1, 2],
               [4, 5]])
In [56]: arr2d[1, :2] # Zweite Zeile und die ersten zwei Spalten
Out[56]: array([3, 4])
In [57]: arr2d[:2, 2]
Out[57]: array([2, 5])
In [58]: arr2d[:2, 1:] = 0
         arr2d
Out[58]: array([[0, 0, 0],
                [3, 0, 0],
                [6, 7, 8]])
```

Kontrollfragen:

```
In [59]: # Gegeben:
         array3 = np.arange(11,20).reshape(3,3)
         array3
Out[59]: array([[11, 12, 13],
                [14, 15, 16],
                [17, 18, 19]])
In [60]: # Frage 1: Was ist der Output?
         array3[1,2]
Out[60]: 16
In [61]: | # Frage 2: Was ist der Output?
         array3[:2]
Out[61]: array([[11, 12, 13],
                [14, 15, 16]])
In [62]: # Frage 3: Was ist der Output?
         array3[:2, 1:]
Out[62]: array([[12, 13],
                [15, 16]])
```

Advanced Indexing

Darunter fallen boolsche Indexierung und Ganzzahlindexierung.

Boolsche Indixierung

Grundsätzlicher Mechanismus:

Üblicherweise generieren wir den boolschen Array über eine Bedingung:

```
In [66]: bool_arr = (x > 0)
    bool_arr

Out[66]: array([ True, False, True, False, False])

In [67]: x[bool_arr] # Alle x-Werte grösser 0

Out[67]: array([21, 19])

In [68]: x[x > 0] # Man kann die Bedingung auch direkt übergeben.

Out[68]: array([21, 19])
```

Weitere Beispiele:

```
In [69]: zivilstand = np.array(['ledig', 'geschieden', 'verheiratet', 'ledig'])
In [70]: alter = np.array([27, 55, 35, 18])
In [71]: ist_ledig = (zivilstand == 'ledig') # boolscher Array
In [72]: alter[ist_ledig] # Alter von ledigen Personen
Out[72]: array([27, 18])
In [73]: # Es ginge auch direkt: alter[zivilstand == 'ledig']
Out[73]: array([27, 18])
In [74]: alter[ist_ledig][0] # Alter der ersten ledigen Person
Out[74]: 27
```

```
In [75]: alter[zivilstand != 'ledig'] # Alter von nicht ledigen Personen
Out[75]: array([55, 35])
In [76]: alter[~(zivilstand == 'ledig')] # geht auch so
Out[76]: array([55, 35])
```

Der Operator " ~ " ist sehr hilfreich, um einen (bereits erstellten) boolschen Array zu invertieren.

```
In [77]: alter[~ist_ledig] # Das Alter aller Personen, die NICHT ledig sind.
Out[77]: array([55, 35])
```

Bedingungen können auch kombiniert werden:

```
In [78]: auswahl = (zivilstand == 'ledig') | (zivilstand == 'geschieden')
auswahl

Out[78]: array([ True, True, False, True])

In [79]: alter[auswahl]

Out[79]: array([27, 55, 18])
```

- Die Schlüsselwörter and und or funktionieren nicht mit boolschen Arrays. Man benützt & (und) und | (oder).
- Boolsche Indexierung funktioniert auch für Arrays höherer Dimension:

```
In [80]: data = np.array([[9, -2], [7, 0], [-4, 1]])
         data
Out[80]: array([[ 9, -2],
                [7,0],
                [-4, 1]])
In [81]: | auswahl = [True, False, True]
In [82]: data[auswahl] # erste Zeile ja, zweite nein, dritte ja
Out[82]: array([[ 9, -2],
                [-4, 1]])
In [83]: data < 0
                      # welche Elemente sind negativ?
Out[83]: array([[False, True],
                [False, False],
                [ True, False]])
In [84]: data[data < 0]</pre>
                          # negative Elemente auswählen
Out[84]: array([-2, -4])
In [85]: data[data < 0] = 0 # Alle negativen Werte mit 0 ersetzen.
         data
Out[85]: array([[9, 0],
                [7, 0],
                [0, 1]])
```

Kontrollfragen:

```
In [86]: # Gegeben:
         print('array1:', array1)
         array2 = np.array(list('abcdef'))
         print('array2:', array2)
         array1: [3 4 1 0 2 2]
         array2: ['a' 'b' 'c' 'd' 'e' 'f']
In [87]: # Frage 1: Was ist der Output?
         array2[[True, False, True, False, False, False]]
Out[87]: array(['a', 'c'], dtype='<U1')</pre>
In [88]: # Frage 2: Was ist der Output?
         array2[array1 == 2]
Out[88]: array(['e', 'f'], dtype='<U1')</pre>
In [89]: # Frage 3: Was ist der Output?
         array2[array1 > 0]
Out[89]: array(['a', 'b', 'c', 'e', 'f'], dtype='<U1')</pre>
In [90]: # Frage 4: Was ist der Output?
         array1[(array2 == 'b') | (array2 == 'f')]
Out[90]: array([4, 2])
```

Ganzzahlindexierung (Integer Indexing, auch Fancy Indexing)

Fancy Indexing ist ein NumPy-Begriff für das Indexieren mit Ganzzahlen-Arrays.

```
In [91]: # Beispieldaten:
    array2
Out[91]: array(['a', 'b', 'c', 'd', 'e', 'f'], dtype='<U1')
In [92]: array2[0] # erster Wert (Repetition)
Out[92]: 'a'
In [93]: # Auswahl von mehreren Werten mit gewünschter Reihenfolge:
    array2[[0, 2, 1, 0]]
Out[93]: array(['a', 'c', 'b', 'a'], dtype='<U1')</pre>
```

Beachten Sie, dass eine Liste (zwischen den eckigen Klammern) übergeben wird und dass auch Elemente wiederholt ausgewählt werden können.

```
In [95]: arr[0] # Repetition: Auswahl der ersten Zeile
Out[95]: array([0, 1, 2])
In [96]: arr[0,:] # es geht auch so (erste Zeile und alle Spalten)
Out[96]: array([0, 1, 2])
In [97]: # Auswahl von mehreren Zeilen mit gewünschter Reihenfolge:
         arr[[3, 0, 3]] # Die Zeile 3 (vierte) wird zweimal ausgewählt!
Out[97]: array([[ 9, 10, 11],
                [ 0, 1, 2],
                [ 9, 10, 11]])
In [98]: | arr[-1] # letzte Zeile
Out[98]: array([12, 13, 14])
In [99]: arr[:,[0,2]]
                       # alle Zeilen und Spalten 0 und 2 auswählen
Out[99]: array([[ 0, 2],
                [ 3, 5],
                [6,8],
                [ 9, 11],
                [12, 14]])
```

• *Hinweis:* "Advanced Indexing" erstellt *eine Kopie der Daten*, selbst wenn der zurückgegebene Array unverändert ist (während Slicing einen View auf die Originaldaten erstellt).

Kontrollfragen:

```
In [100]: # Gegeben:
    array2
Out[100]: array(['a', 'b', 'c', 'd', 'e', 'f'], dtype='<U1')
In [101]: # Frage 1: Was ist der Output?
    array2[[0, 0, 1]]
Out[101]: array(['a', 'a', 'b'], dtype='<U1')
In [102]: # Frage 2: Was ist der Output?
    array2[[-1, -3]]
Out[102]: array(['f', 'd'], dtype='<U1')</pre>
```

Arrays transponieren

Wir beschränken uns hier auf Arrays mit zwei Dimensionen bzw. Matrizen.

Universal Functions

Eine "Ufunc" ist eine Funktion, welche elementweise Operationen auf Ndarrays ausführt.

Binary Ufuncs (Ufuncs auf zwei Arrays)

```
In [110]: x = np.array([1, 2, 5])
y = np.array([3, -7, 0])
np.maximum(x, y)
# Nimmt jeweils das Maximum von x und y pro Indexposistion
Out[110]: array([3, 2, 5])
```

Array-basiertes Programmieren

- Viele Datenverarbeitungsaufgaben können statt mit Loops mit kurzen Array-Ausdrücken umgesetzt werden.
- Man spricht von Vektorisierung.
- Die Vektorisierung führt dazu, dass Operationen viel schneller ausgeführt werden als mit Loops.
- **Einfaches Beispiel**: Die Werte von zwei Listen sollen posisitionsbezogen zusammenaddiert werden und in einer dritten Liste abgespeichert werden.

```
In [111]: # Gegeben:
    list1 = [1, 5, -1, 0, 3]
    list2 = [2, 3, 0, -2, 6]
```

Man könnte einen for-Loop oder eine List-Comprehension zur Lösung nutzen. Einfacher geht es mit NumPy-Arrays:

Bedingungen als Array-Operationen formulieren

Angenommen wir haben zwei Werte-Arrays und einen boolschen Array:

```
In [113]: cond = np.array([True, False, True, True, False])
    print('arr1:', arr1)
    print('arr2:', arr2)
    print('cond:', cond)

arr1: [ 1 5 -1 0 3]
    arr2: [ 2 3 0 -2 6]
    cond: [ True False True True False]
```

Es soll nun ein Wert von arr1 genommen werden, wenn der entsprechende Wert in cond True ist, ansonsten soll der Wert von arr2 stammen.

Am einfachsten setzt man hierzu auf die Funktion np. where, welche der Excel-Funktion WENN gleicht.

```
In [114]: result = np.where(cond, arr1, arr2)
    result
Out[114]: array([ 1,  3, -1,  0,  6])
```

Weitere Beispiele, wie man where einsetzen kann bei Datenanalysen:

```
In [115]: np.where(arr1 > arr2, arr1, arr2)
# Nimmt jeweils den grösseren (oder gleich grossen) Wert der beiden Arrays.
Out[115]: array([2, 5, 0, 0, 6])
```

Kontrollfrage:

```
In [116]: # Frage: Was ist der Output?
    np.where([True, False, True], [1, 2, 3], [10, 20, 30])
Out[116]: array([ 1, 20, 3])
```

Mathematische und statistische Methoden

- Mit NumPy können (Quasi-) Zufallszahlen (aus verschiedenen Verteilungen) generiert werden.
- Wenn wir "Zufallszahlen" generieren, können wir einen sogenannten Seed setzten, damit wir reproduzierbare Ergebnisse erhalten (immer die gleichen Werte).

```
In [117]: np.random.seed(327)
# Dadurch erhalten wir immer die gleichen "Zufallszahlen".
# In der Klammer kann auch eine andere natürliche Zahl
# zwischen 0 und 2**32 - 1 stehen!
```

Sogenannte Aggregationen (oder Reduktionen), wie sum (Summe), mean (arithm. Mittelwert) oder var (Varianz) kann man entweder als Methode oder np-Funktion aufrufen:

```
In [120]: arr.sum()
Out[120]: 39
In [121]: np.sum(arr)
Out[121]: 39
In [122]: np.mean(arr)
Out[122]: 3.25
```

Die Aggregation kann über alle Werte des Arrays geschehen oder entlang von Achsen (Zeilen / Spalten).

```
In [123]: # Beispieldaten:
          np.random.seed(99)
          arr = np.random.randint(0, 4, (3,4))
Out[123]: array([[1, 3, 1, 0],
                 [1, 0, 2, 0],
                  [1, 0, 1, 3]])
In [124]: | arr.sum()
          # arithmetisches Mittel aller Werte im Array arr
Out[124]: 13
In [125]: arr.sum(axis=0)
           # Aggregation entlang von Zeilen (also Spaltenmittelwerte)
Out[125]: array([3, 3, 4, 3])
In [126]: arr.sum(axis=1)
          # Aggregation entlang von Spalten (also Zeilenmittelwerte)
Out[126]: array([5, 3, 5])
In [127]: | arr.mean(axis=1) # Mittelwerte pro Zeile
Out[127]: array([1.25, 0.75, 1.25])
```

Andere Methoden, wie cumsum und cumpord, aggregieren nicht sondern erzeugen einen neuen Array mit kumulierten Werten.

Kontrollfragen:

Methoden für boolsche Arrays

```
In [132]: # Vorbemerkung: True wird als 1 und False als 0 gerechnet:
          True + False + True
Out[132]: 2
In [133]: boolarray = np.array([True, False, True, False])
         boolarray.sum() # Anzahl True
Out[133]: 2
In [134]: boolarray.any() # Mindestens ein True?
Out[134]: True
In [135]: boolarray.all() # Sind alle True?
Out[135]: False
In [136]: # Zur Erinnerung:
          arr2
Out[136]: array([ 0, 1, 3, 2, -1])
In [137]: arr2 > 0
                             # Welche Elemente sind positiv?
Out[137]: array([False, True, True, True, False])
In [138]: (arr2 > 0).sum() # Anzahl positiver Werte
Out[138]: 3
```

```
In [139]: print(arr1)
    print(arr2)

[ 1 5 -1 0 3]
    [ 0 1 3 2 -1]

In [140]: # Ist an mind. einer Stelle arr1 grösser als arr2?
    (arr1 > arr2).any()
Out[140]: True
```

Kontrollfragen:

Sortieren

```
In [145]: # Ausgangslage:
    arr2 = np.array([ 0,  1,  3,  2, -1])

In [146]: sorted(arr2)  # arr2 bleibt erhalten.

Out[146]: [-1,  0,  1,  2,  3]

In [147]: arr2

Out[147]: array([ 0,  1,  3,  2, -1])

In [148]: np.sort(arr2)  # arr2 bleibt erhalten.

Out[148]: array([-1,  0,  1,  2,  3])

In [149]: arr2

Out[149]: array([ 0,  1,  3,  2, -1])
```

```
In [150]: arr2.sort()  # Sortierung ist permanent.
arr2
Out[150]: array([-1, 0, 1, 2, 3])
```

Hinweis: Die Methode sort sortiert inplace. Die Funktion np.sort erstellt hingegen eine Kopie.

Mengenoperationen

Oft will man wissen, welche (oder auch wie viele) einzigartige Werte (unique values) vorhanden sind.

Dateien einlesen und speichern

Da wir später Datensätze nur in Pandas einlesen und speichern, werden wir diesen Abschnitt im Lehrmittel nicht behandeln.

Lineare Algebra

Wird in diesem Kurs ebenfalls nicht thematisiert.

(Pseudo-) Zufallszahlengenerator

Zuvor haben wir bereits (ad hoc) Zufallszahlen mit NumPy erstellt. Es folgt ein Überblick und einige Ergänzungen

Für die Reproduzierbarkeit von Resultaten kann ein Seed gesetzt werden:

```
In [156]: # Alternative Funktion, die noch zusätzliche Argumente kennt:
          np.random.normal(loc=5, scale=2, size=(3, 2))
          # Normalverteilte Zufallsvariablen mit Mittelwert 5 und
          # Standardabweichung 2 in einem 3x2-Array.
Out[156]: array([[2.83334474, 3.30573661],
                 [5.31655633, 5.19819463],
                 [6.05362144, 3.93661013]])
In [157]: # Uniformverteilung [0, 1):
          np.random.rand(2, 3)
Out[157]: array([[0.44472452, 0.76735829, 0.62039608],
                 [0.67265825, 0.91189577, 0.8078284 ]])
In [158]: # Diskrete Uniformverteilung:
          np.random.randint(1, 7, (3, 4)) # z. B. Würfelaugen
Out[158]: array([[4, 1, 4, 6],
                 [2, 4, 1, 3],
                 [6, 6, 3, 2]])
```

Im Lehrmittel werden weitere Funktionen vorgestellt, die wir aber im Kurs nicht benötigen.

Kontrollfragen:

```
In [159]: # Aufgabe 1: Erstellen Sie den Vektor z mit 5 Realisationen aus einer
    # Standardnormalverteilung.
    z = np.random.randn(5)
    z

Out[159]: array([-1.53762265,  0.01595783, -1.48867534, -0.22020744,  0.90188405])

In [160]: # Aufgabe 2: Erstellen Sie den Vektor z mit 1000 Realisationen aus einer
    # Uniformverteilung (zwischen 0 und 1).
    # Ermitteln Sie danach den Mittelwert von z.
    z = np.random.rand(1000)
    z.mean()
    # Der Erwartungswert (Mittelwert, wenn n gegen unendlich geht) ist 0.5.
Out[160]: 0.4917437285165189
```

Fazit

- Während der Rest des Kurses sich darauf konzentriert, mit **Pandas** Data-Wrangling-Skills zu entwickeln, werden wir weiterhin mit einem ähnlichen Array-basierten Stil arbeiten.
- In Anhang A des Lehrmittels werden weiterführende NumPy-Kenntnisse vermittelt, auf die wir im Kurs nicht eingehen können.